SSTの気体分子運動論からの検証(基研研究会「非平衡系の新局面-運動・機能・構造-」,研究会報告)

早川, 尚男; 金, 賢得

SSTの気体分子運動論からの検証

京大人環　早川尚男、金賢得

先の物理学会で多くの聴衆を集めた様に非平衡定常熱力学(SST)の定式化については専門家、非専門家を問わず多大な関心が持たれている。本研究会でも田崎の講演でSSTの概略が紹介され、活発な討論の対象となった。従来の非平衡定常熱力学で問題になるのは予言能力の乏しさであるが、最近投稿された論文で、佐々と田崎[1]は2つの定性的な予言を行なっている。そのうちの一つの予言である熱勾配によって圧力が上昇するという予言が正しいかどうかを気体分子運動論から検証しようというのが本論文の趣旨である。

本研究はまだ未完成であり、将来的に結果が変わり得るものである。実際、研究会での発表後に理解が進み、同時にSST側でも論文におけるような定性的な予言ばかりではなく、Maxwellの関係式に類似の等式もその後出されており情勢は大きく変わりつつある。例えば研究会では温度勾配一定の仮定の下で計算を行なった結果を発表したが、実際には熱流一定という仮定を置くべきであり、熱伝導率が温度に依存するので両者は一致しない。またSST自体も平衡希薄気体で起こるKnudsen効果の様な現象を熱流のない状態での非摂動系として設定しているのではなく、希薄気体分子運動論とは違った問題を議論していることが明らかになりつつある。更に気体分子運動論の枠の中でも従来信じられていた普遍的な結果はどうやら得られず、モデルに強く依存する結果となることが分かりつつある。

考えている系は,以下の通りである。温度T_0の熱浴に接した平衡系の立方体型セルと温度勾配のある非平衡系の立方体型セルが温度T_0の境界壁($x=0$平面)を介して接してるモデルである。境界壁の中央には平均自由行程より充分小さな小孔が空いており、両セルはこの小孔を通して関係しあっている。境界壁と対面する非平衡系のセル端壁($x=L$平面)には温度$T_1(\neq T_0)$の熱浴が接している。

解析にはInformation Theory[2]を用いていた。Information Theoryでは質量、運動量、運動エネルギーを一定として更にH関数で定義された局所エントロピーを極大とする様に分布関数を決定している。そうすると熱流Jの2次迄で分布関数fは比較的簡単な

$$f=n(\frac{m}{2\pi kT_K})^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_K}}[1+\frac{m(\mathbf{J}\cdot\mathbf{v})}{5nk^2T_K^2}(\frac{m\mathbf{v}^2}{kT_K}-5)+\frac{2m\mathbf{J}^2}{5n^2k^3T_K^3}-\frac{m^2\mathbf{v}^2\mathbf{J}^2}{5n^2k^4T_K^4}+\frac{m^2(\mathbf{J}\cdot\mathbf{v})^2}{25n^2k^4T_K^4}(\frac{m\mathbf{v}^2}{kT_K}-5)^2]. \tag{1}$$

という形になる。ここでn,m,k,T_K,vはそれぞれ粒子数密度、粒子質量、ボルツマン定数、(運動エネルギーで定義される)温度、粒子速度である。

この分布関数を用いるといろいろな物理量を計算できる。例えば定常状態の非平衡系のセルにおける数密度は

$$n=n_0(1-\frac{3m\lambda^2\partial_x {T_0}^2}{25n_0^2k^3T_0^3})<n_0. \tag{2}$$

と求まる。ここでλは熱伝導率であり

$$\lambda\equiv\frac{5}{2}\frac{nk^2T_0\tau}{m}. \tag{3}$$

であり、緩和時間τは粒径dのハードコアでは

$$\tau = \frac{5\sqrt{m}}{16\sqrt{\pi}d^2 n\sqrt{kT_0}} \tag{4}$$

となる。また平衡系のセルと非平衡系のセルの誘導圧力δP_{xx}は２次の圧力テンソルを計算することで求められる:

$$\Delta P_{xx} = nkT_0 - n_0 kT_0 + \frac{12m\lambda^2 \partial_x {T_K}^2}{25nk^2 T_K^2}. \tag{5}$$

密度の変化分 (2) を考慮すると結局 (5) は

$$\Delta P_{xx} = \frac{12m\lambda^2 \partial_x {T_K}^2}{25n_0 k^2 T_0^2} > 0, \tag{6}$$

となり、確かに非平衡側で圧力が上がる結果を得た。この結果はSSTの予言と矛盾していない。

しかしここでの一致は偶然であると思われる。先に触れた様にSSTはKnudsen気体からの拡張になっていないのでこの種の計算では正当性を議論できない。またInformation Theoryそのものも問題があり、Boltzmann方程式では必然的に局所平衡、即ち、平衡分布関数の温度と運動エネルギーで定義される温度が等しいのであるがInformation Theoryではその結果を充たさない。またBoltzmannの衝突項を線形化し、緩和時間近似を行なったBGK方程式では (5) の段階でのδP_{xx}は0であり、粒子が逆に流れることで$\delta P_{xx} > 0$を保っている。この結果はMaxwell分子ではBoltzmann方程式の純正Chapman-Enskog法による解析でも変わらないようであるがハードコアや他の系に一般化することはできない。更に全ての計算結果において最近、佐々が導出したSSTの等式は充たしておらず、ほぼ確実に希薄気体はSSTと整合しないことが明らかになりつつある。いずれにしても純正Chapman-Enskog法による分布関数の２次近似は現在のところ存在せず、解析には慎重な計算が必要である。

参考文献

[1] S. Sasa and H. Tasaki, cond-mat/0108365.

[2] D.Jou, J. Casas-Vazquez and G. Lebon, Extended Irreversible Thermodynamics (Springer, Berlin, 1996).